

Универзитет у Београду

Факултет за физичку хемију

Nove fizičkohemiske metode

# NEKOVALENTNE INTERAKCIJE

Milena Petković

**predmet: Nove fizičkohemische metode  
predavanje: Nekovalentne interakcije**

?

# Luisova kiselina i Luisova baza

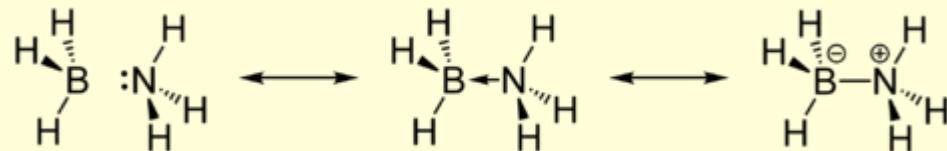
---



A – Luisova kiselina (akceptor elektronskog para)

B – Luisova baza (donor elektronskog para)

AB – sistem sa nekovalentnim interakcijama



# Nekovalentne interakcije (NI)

---

Sistemi sa nekovalentnim interakcijama:  
jedinjenja koja formira bar jedan par Luisove kiseline i Luisove baze.

poreklo informacija o NI:

- eksperiment (kristalne strukture, spektroskopija)
- teorijski proračuni → kooperativnost

Analizirani sistemi u čvrstom i gasovitom stanju.

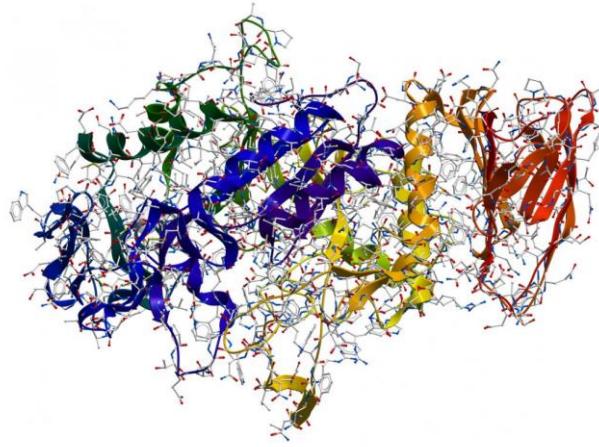
Problem: rastvori

Najpoznatiji predstavnici NI:

- vodonične veze
- steking interakcije

# Vodonične veze: značaj

---



# Vodonične veze: donori i akceptori

---

## donori vodonika

atomi velike elektronegativnosti: O, N i F

- svi halogeni elementi
- većina halkogenih elemenata
- većina pnikogenih elemenata
- atomi pojedinih metala

## akceptori vodonika

atomi sa slobodnim  $e^-$  parovima: O, N i F

- sistemi sa  $\pi e^-$
- pojedine  $\sigma$  veze
- ...



- 1) dokaz da je formirana veza;
- 2) dokaz da se ova veza ostvaruje preko H koji je već vezan za D.

# Vodonične veze: uzroci stabilnosti

---

- elektrostatičke interakcije
- perturbacija elektronske strukture dveju vrsta pri njihovom približavanju i kovalentni doprinos
- sterna odbijanja

# Primer netipične vodonične veze: CH...O

---

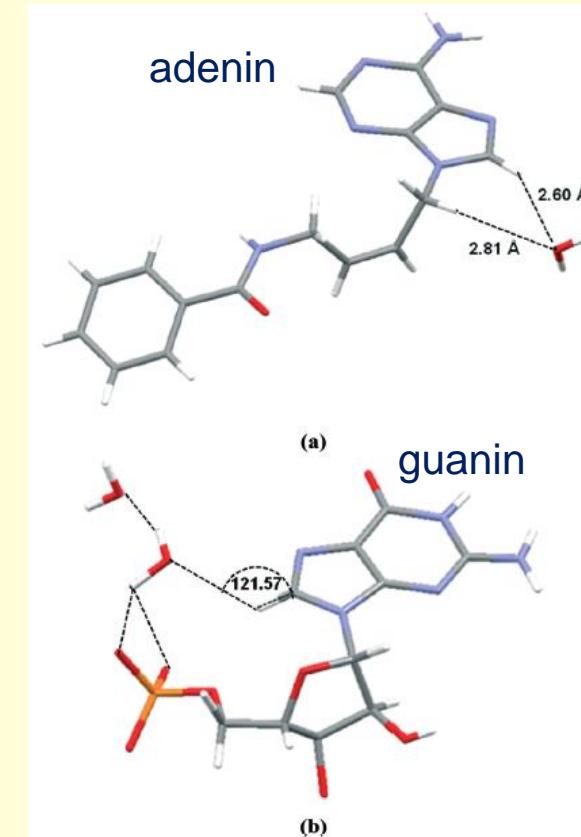
## povećanje polarnosti C-H veze

- promena hibridizacije C atoma,  $sp^3 \rightarrow sp$  ( $HC\equiv CH$ ,  $N\equiv CH$ )
- supstituenti na C atomu koji privlače elektrone (peptidne grupe u proteinima)

značaj:

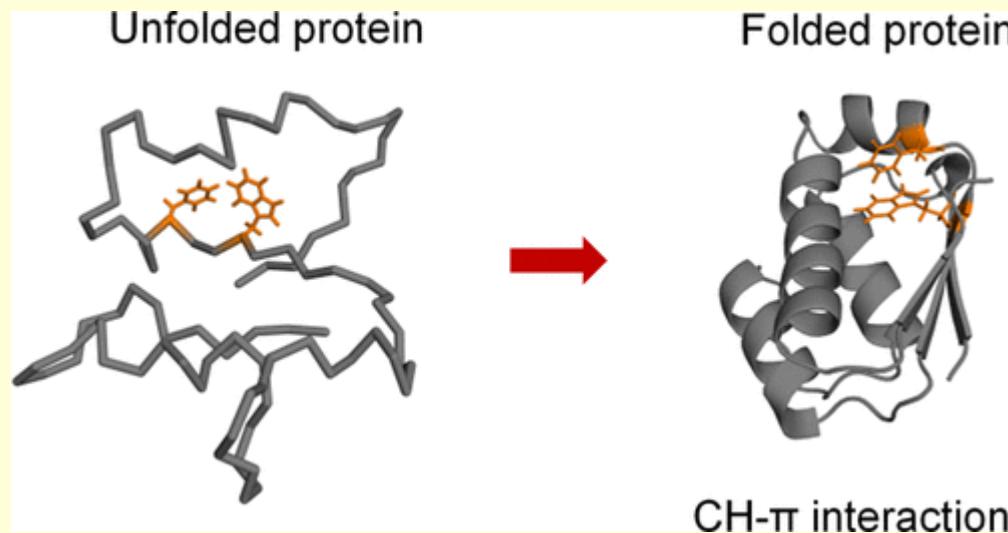
- struktura
- mehanizmi enzimskih reakcija
- ...

D. Ž. Veljković et al. *CrystEngComm.* 16, 2014, 10089



# Primer netipične vodonične veze: CH... π

---

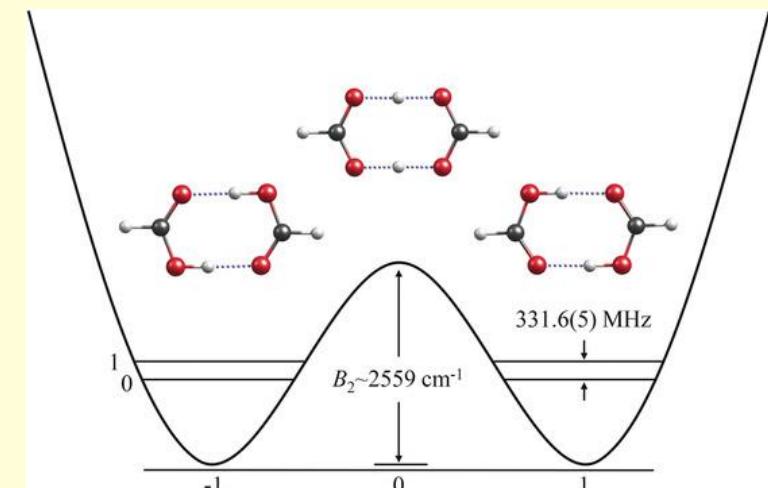
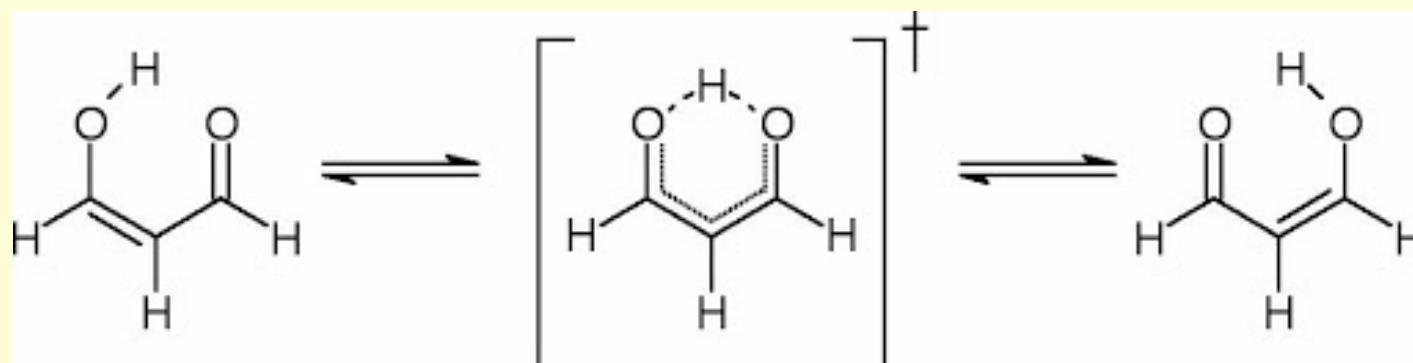


# Vodonične veze: prenos H

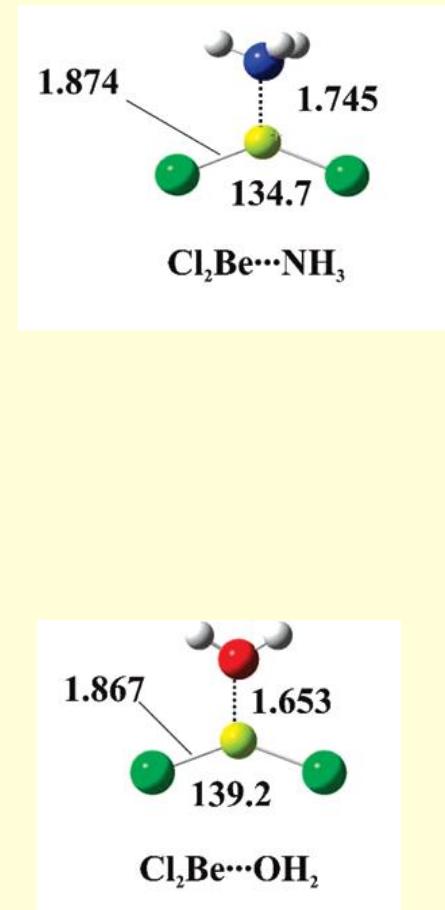
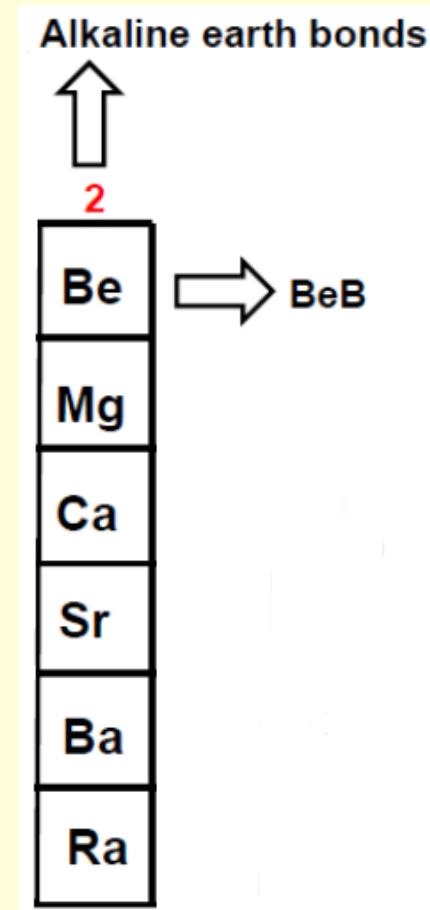
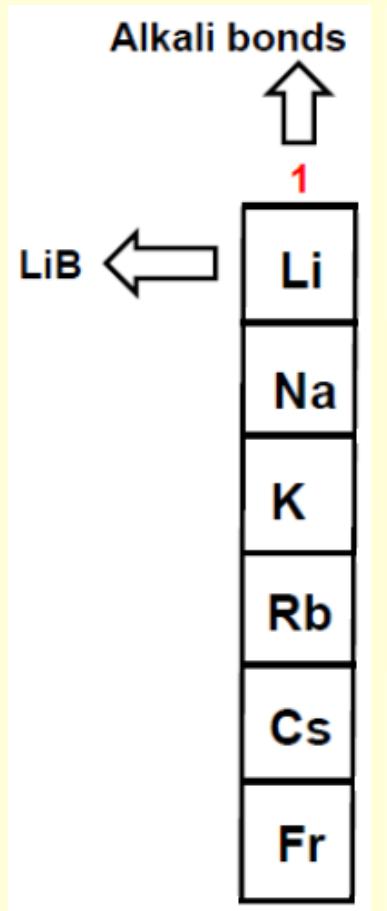
---

prenos:

- vodonika ili protona
- intramolekulski i intermolekulski
- u osnovnom i u pobuđenim elektronskim stanjima
- jednostruki ili dvostruki
- simetričan i asimetričan
- ...

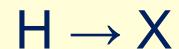


# Alkalne i zemnoalkalne veze



# Nova definicija → nove interakcije

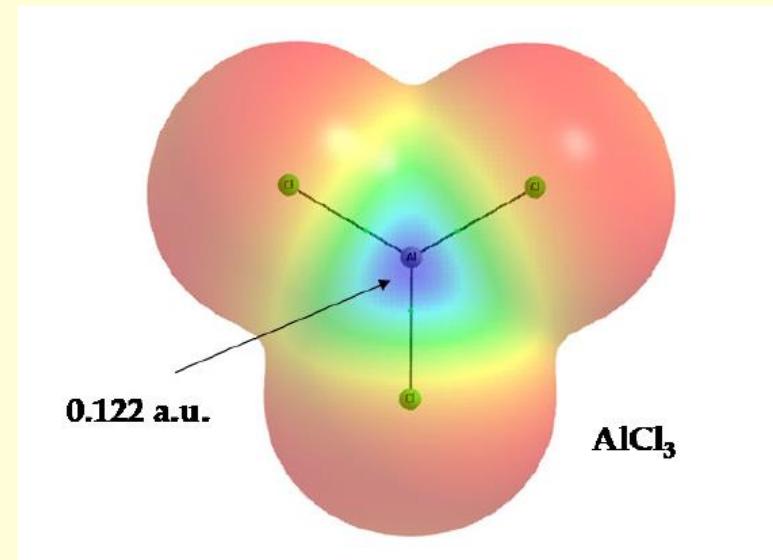
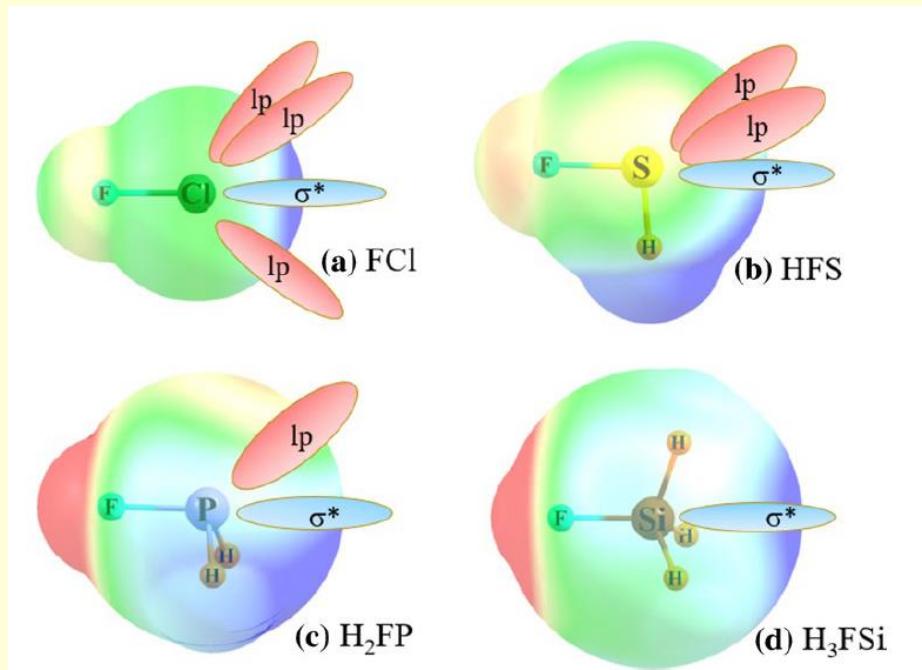
Vodonična veza: interakcija koja uključuje **premošćujući** atom vodonika.



X atom 14-18. (13) grupe periodnog sistema i ima anizotropnu raspodelu naelektrisanja

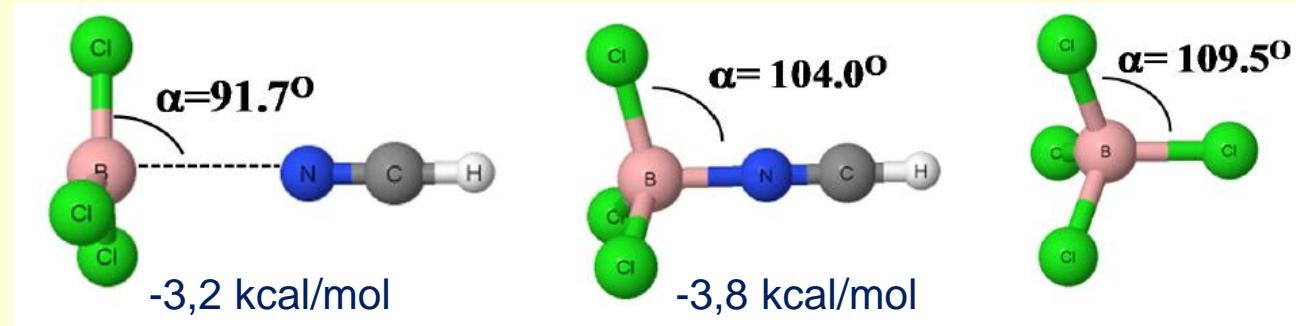


$\sigma$  ( $\pi$ ) šupljina



# Trielne veze

Triel bonds  
↑  
**13**

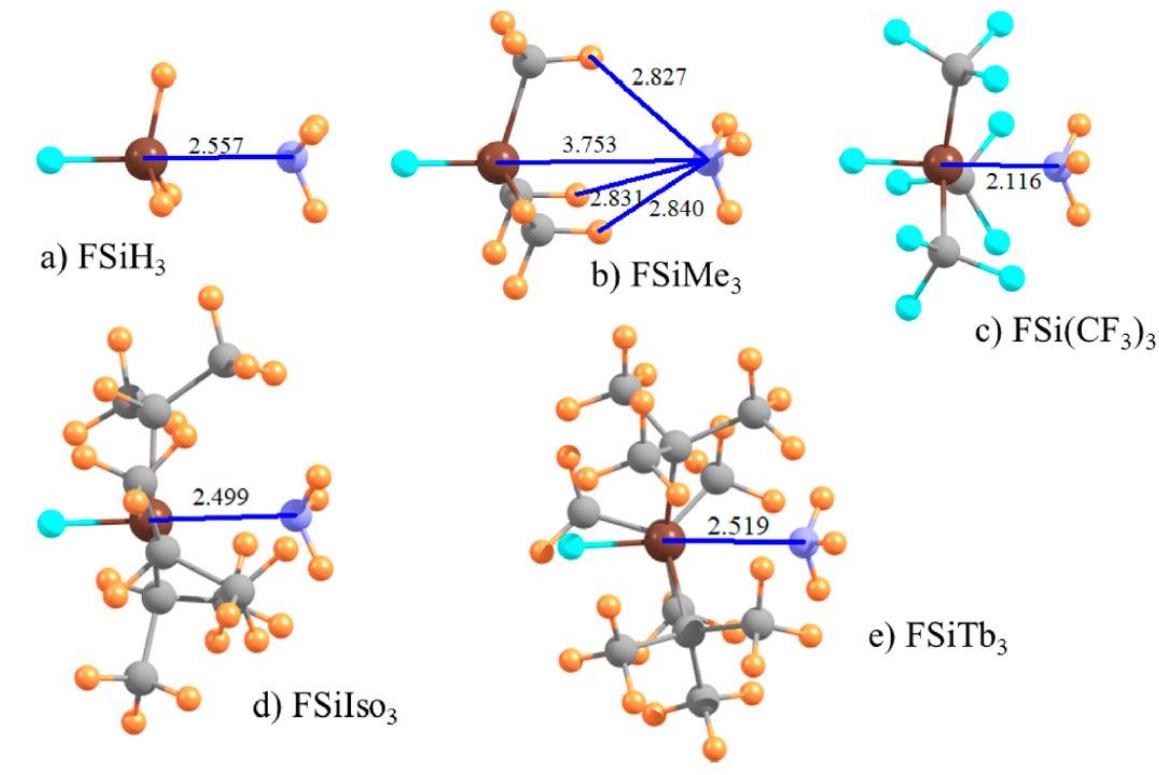


<b>B</b>
<b>Al</b>
<b>Ga</b>
<b>In</b>
<b>Tl</b>
<b>Nh</b>

Sistem	Energija veze kcal/mol
$\text{BCl}_3 \cdots \text{N}_2$	-1,5
$\text{AlH}_3 \cdots \text{NCH}$	-17,7
$\text{BH}_3 \cdots \text{NH}_3$	<b>-30,8</b>
$\text{AlCl}_3 \cdots \text{NH}_3$	<b>-38,8</b>
$\text{AlH}_3 \cdots \text{Cl}^-$	-52,2

# Tetrelne veze

Tetrel bonds	↑
14	
C	
Si	
Ge	
Sn	
Pb	
Fl	



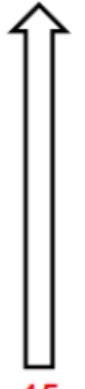
Sistem	Energija veze sa $\text{NH}_3$ kcal/mol
$\text{FSiH}_3$	-5,5
$\text{FSiMe}_3$	-2,2
$\text{FSi}(\text{CF}_3)_3$	-18,2
$\text{FSiIso}_3$	+0,2
$\text{FSiTb}_3$	+10,8

uticaj:

- veličine T atoma
- veličine supstituenta
- prirode supstituenta

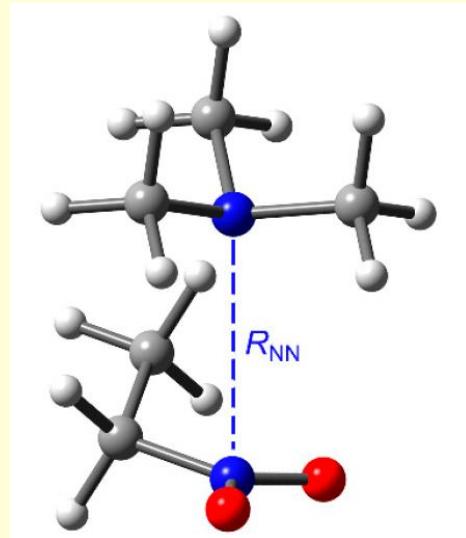
# Pnikogene i halkogene veze

Pnictogen bonds



15

N
P
As
Sb
Bi
Mc

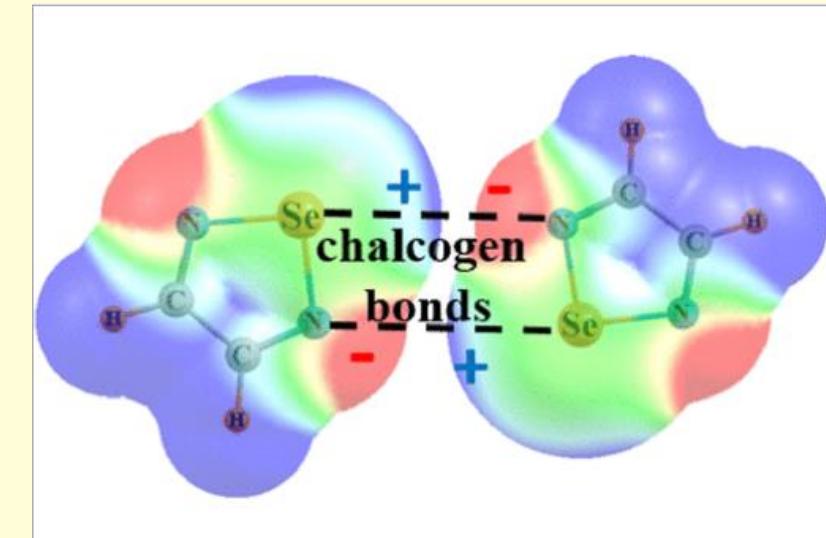


Chalcogen bonds



16

O
S
Se
Te
Po
Lv



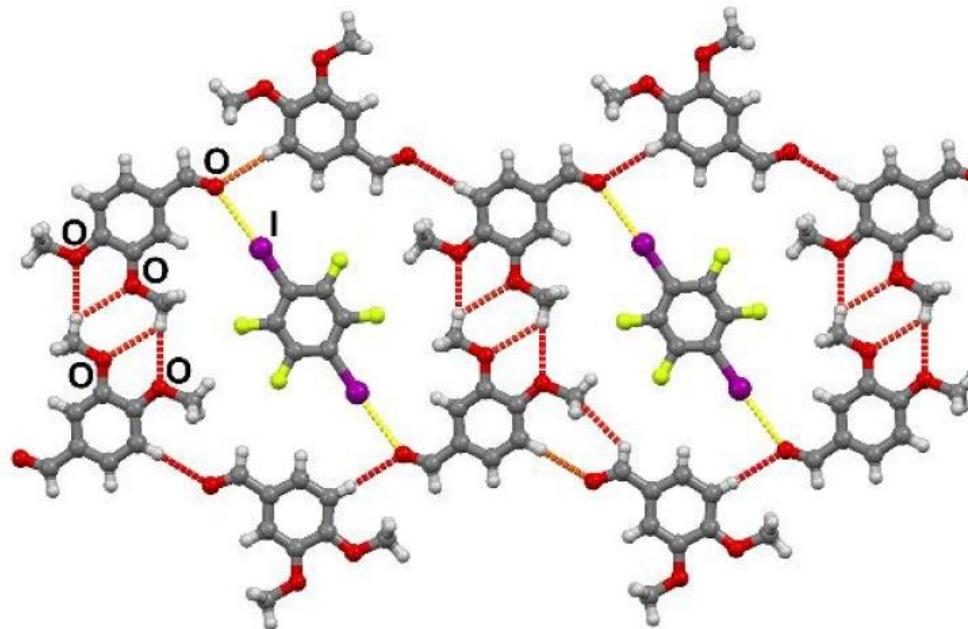
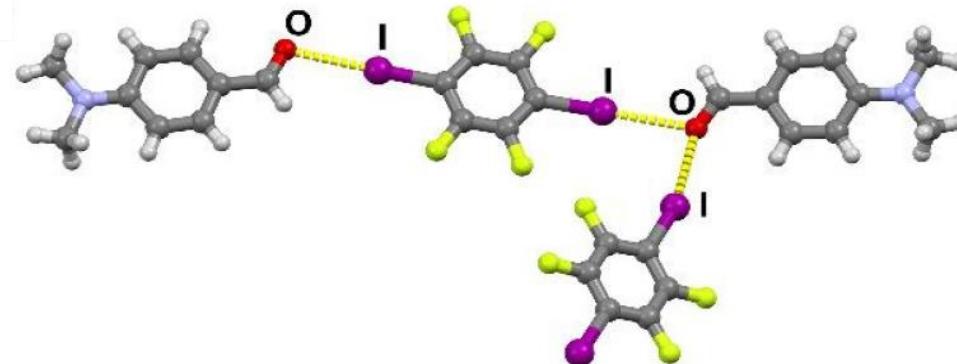
# Halogene veze

Halogen bonds

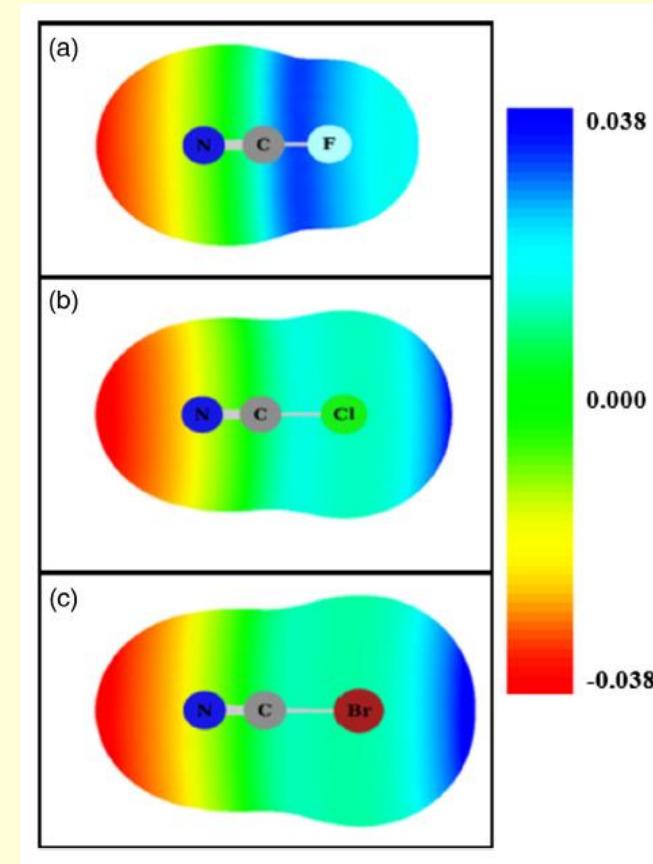
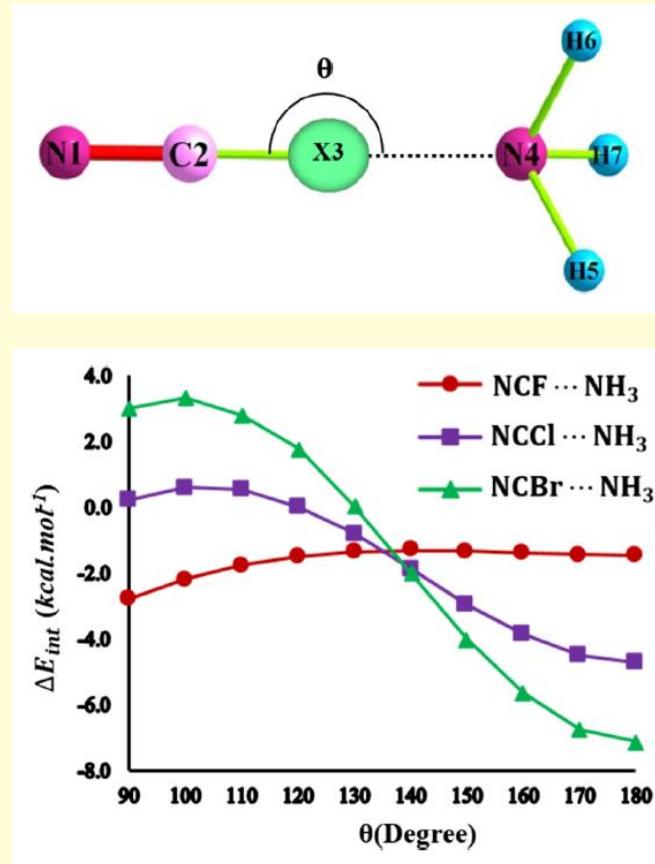


17

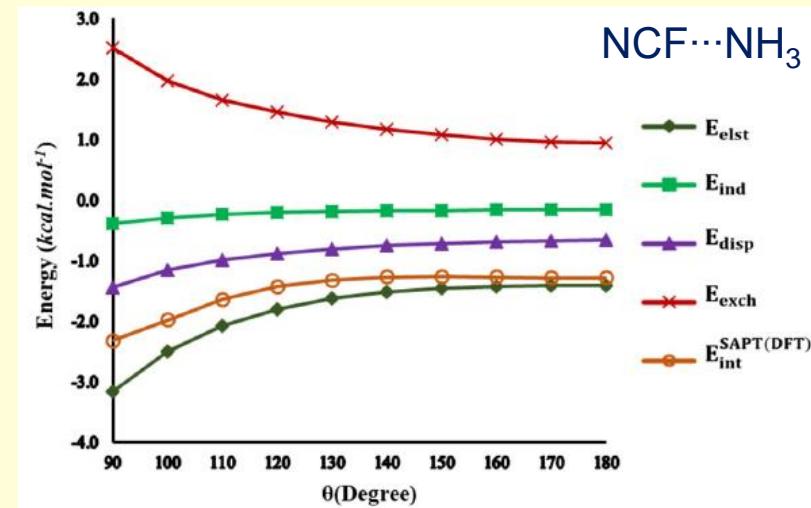
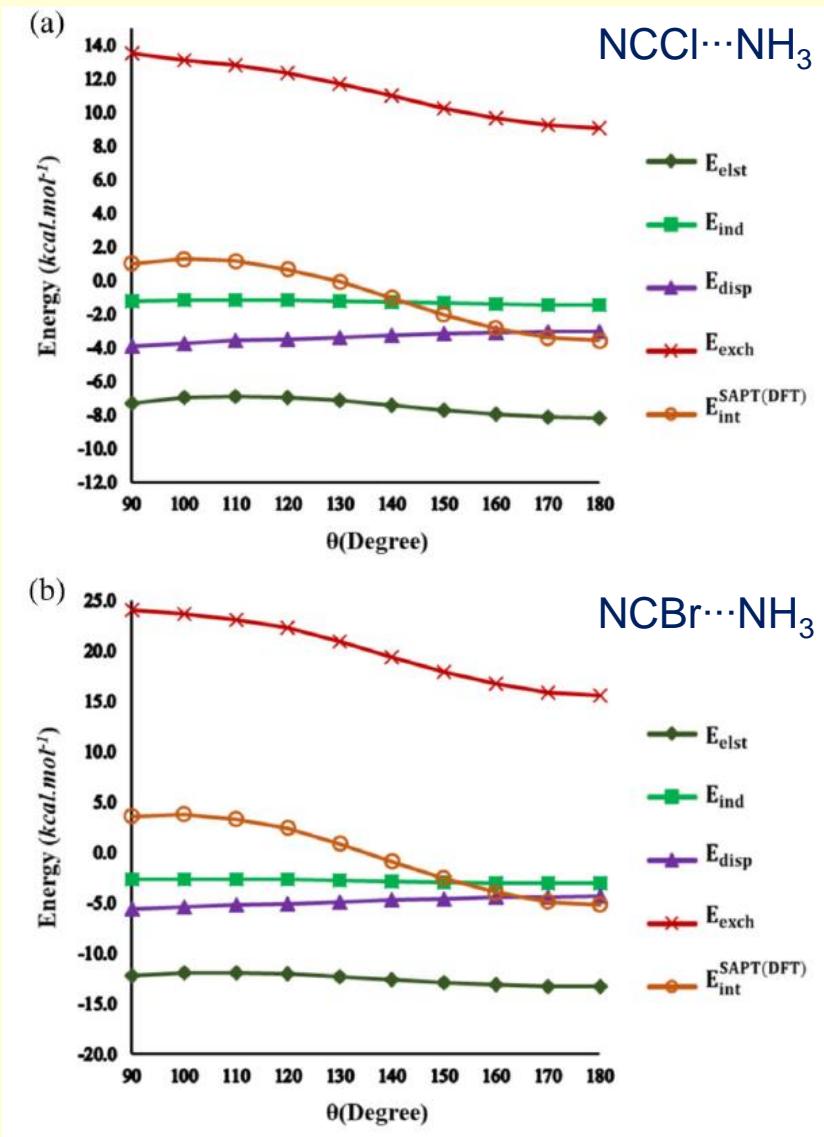
F
Cl
Br
I
At
Ts



# NCX...NH<sub>3</sub> dimeri (1)



# NCX $\cdots$ NH<sub>3</sub> dimeri (2)



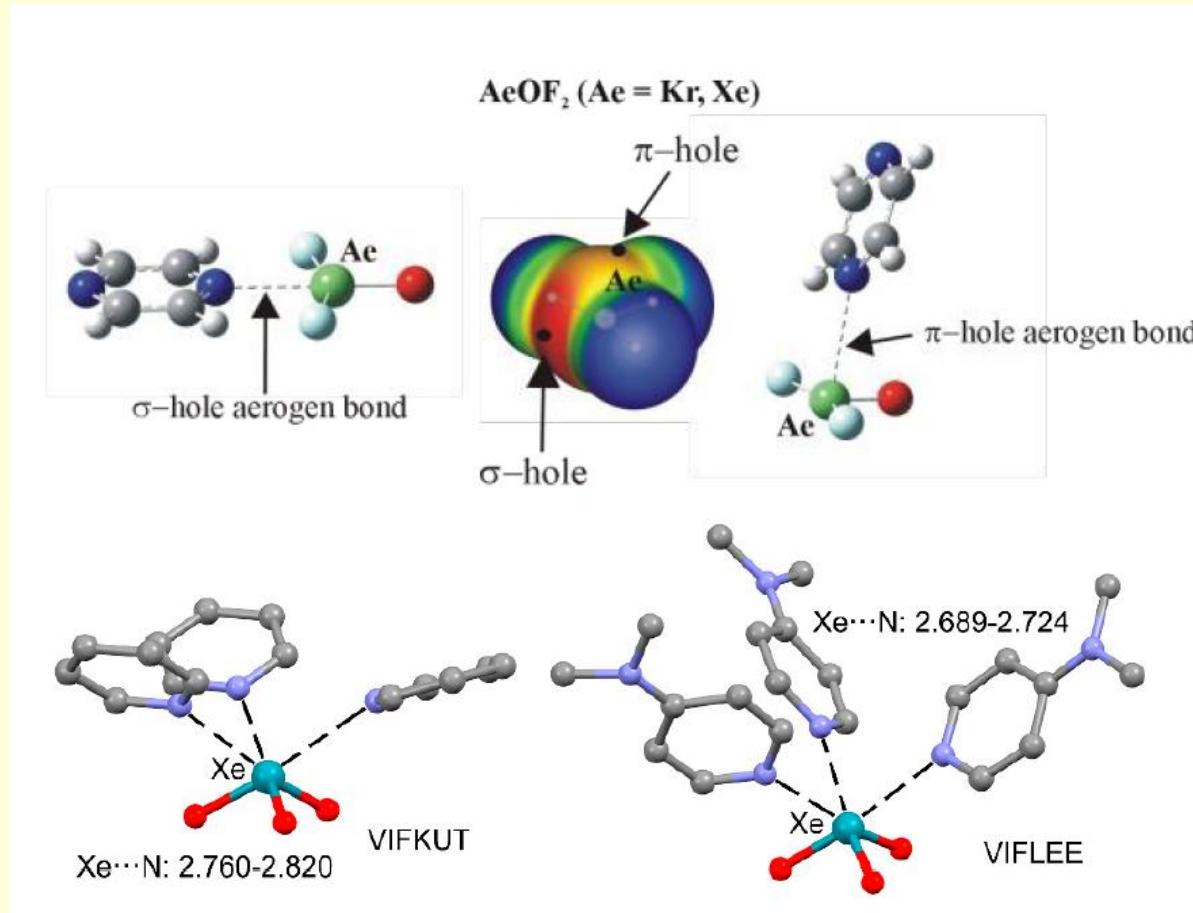
N. Orangi, K. Eskandari, *J. Comp. Chem.*  
41, 2020, 1598

# Aerogene veze

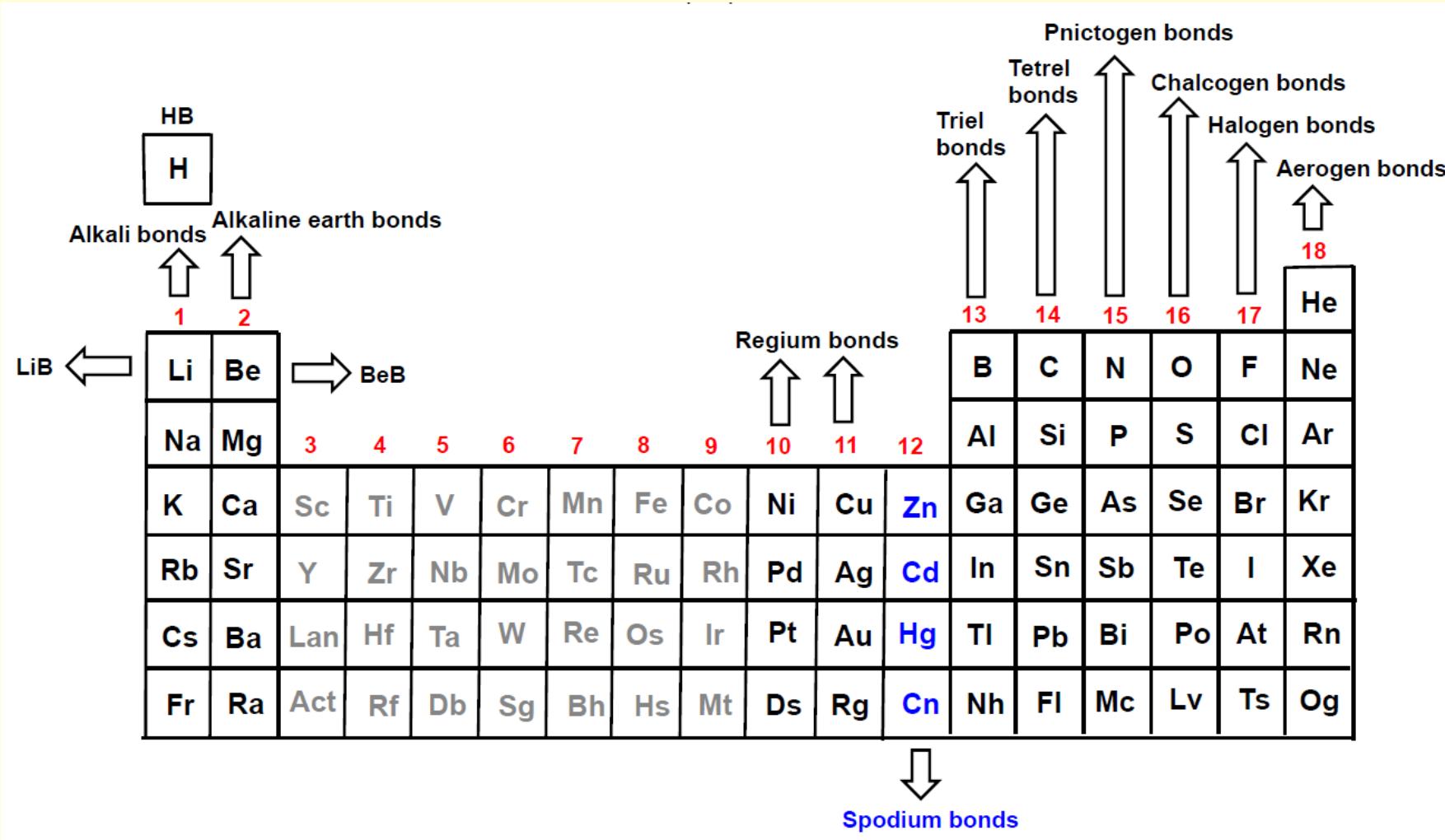
Aerogen bonds



He
Ne
Ar
Kr
Xe
Rn
Og



# Naziv tipa NI potiče od Luisove kiseline



# Luisove baze

---

anjoni

neutralni molekuli:

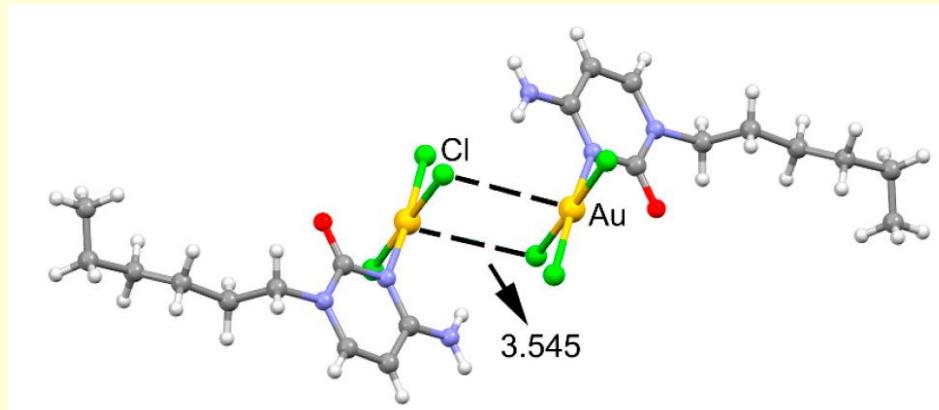
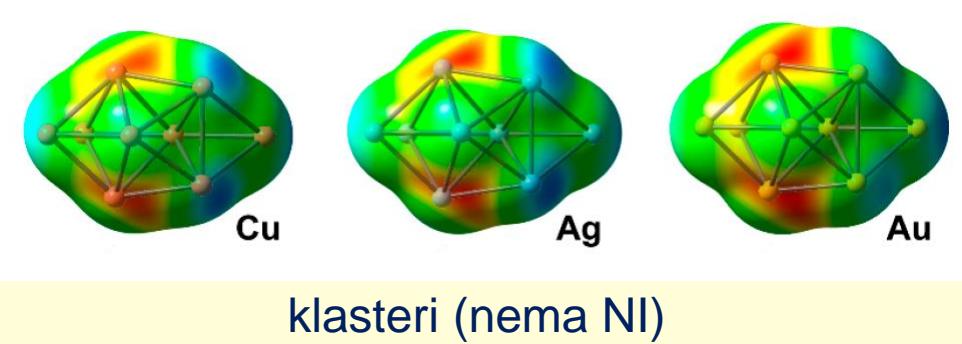
- atomi
- višestruke veze
- aromatični prstenovi
- funkcionalne grupe

# Regijumske veze

Regium bonds



Ni	Cu
Pd	Ag
Pt	Au
Ds	Rg



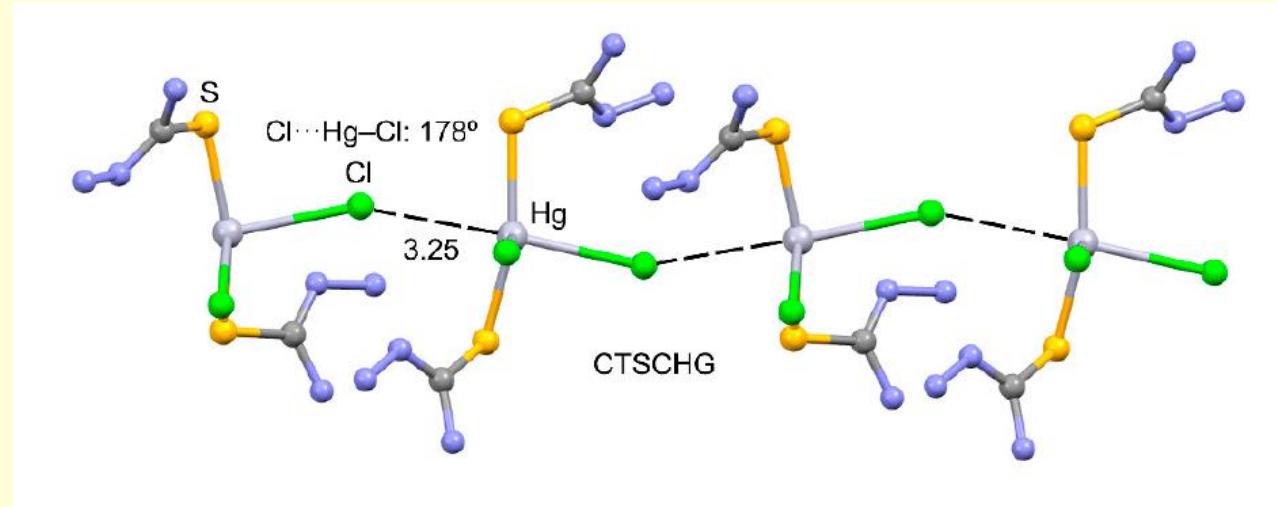
trihloro-(1-heksilcitozin)srebro(III) kompleks

# Spodiumske veze

12	Zn
	Cd
	Hg
	Cn

↓

Spodium bonds



ZnO – spodium (lat)

Hg-Cl veza:

- zbir van der Valsovih radijusa: 3,30 Å
- dužina Hg...Cl veze: 3,25 Å
- zbir kovalentnih radijusa: 2,39 Å

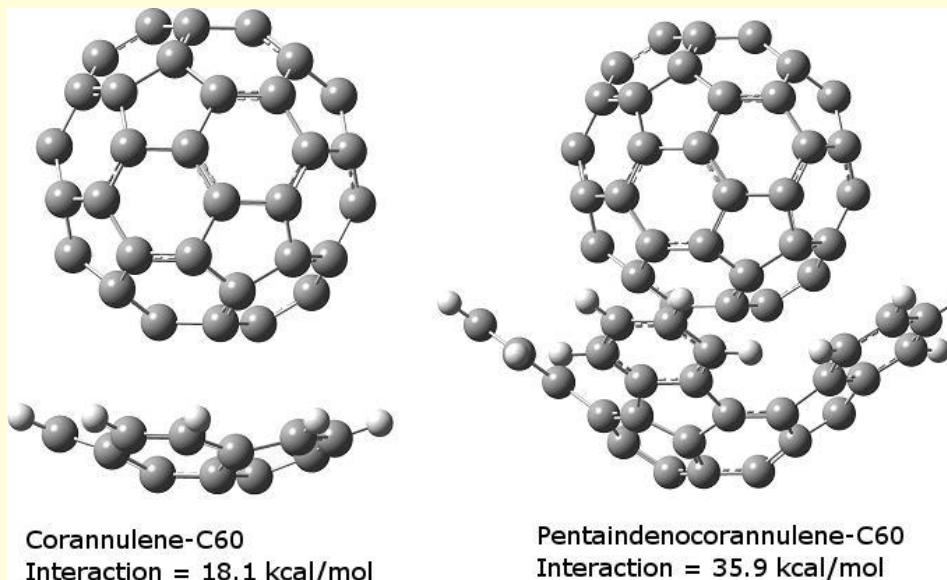
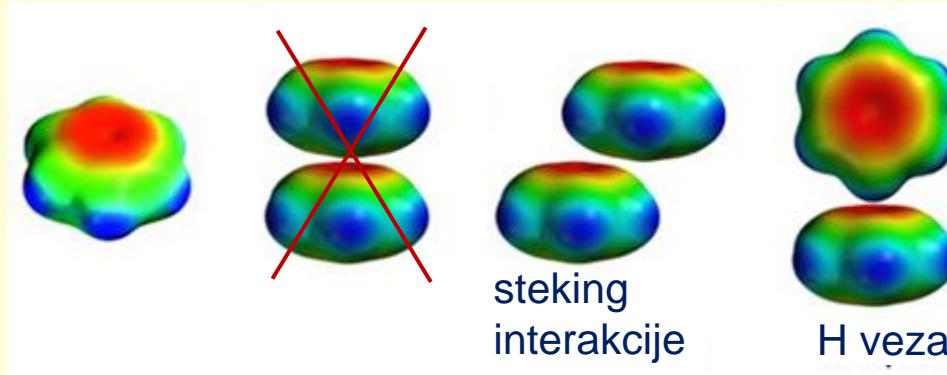
# 3-9. grupe periodnog sistema

---

3	4	5	6	7	8	9
Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh
Lan	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir
Act	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt

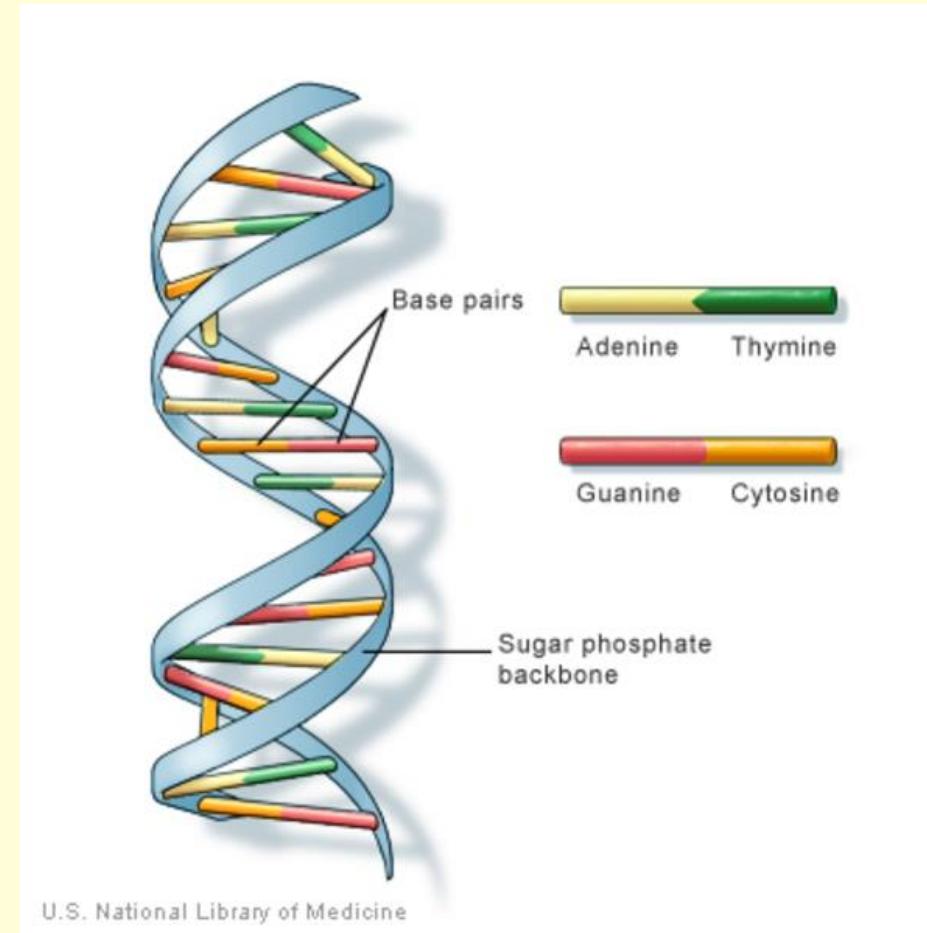
# Steking interakcije

---

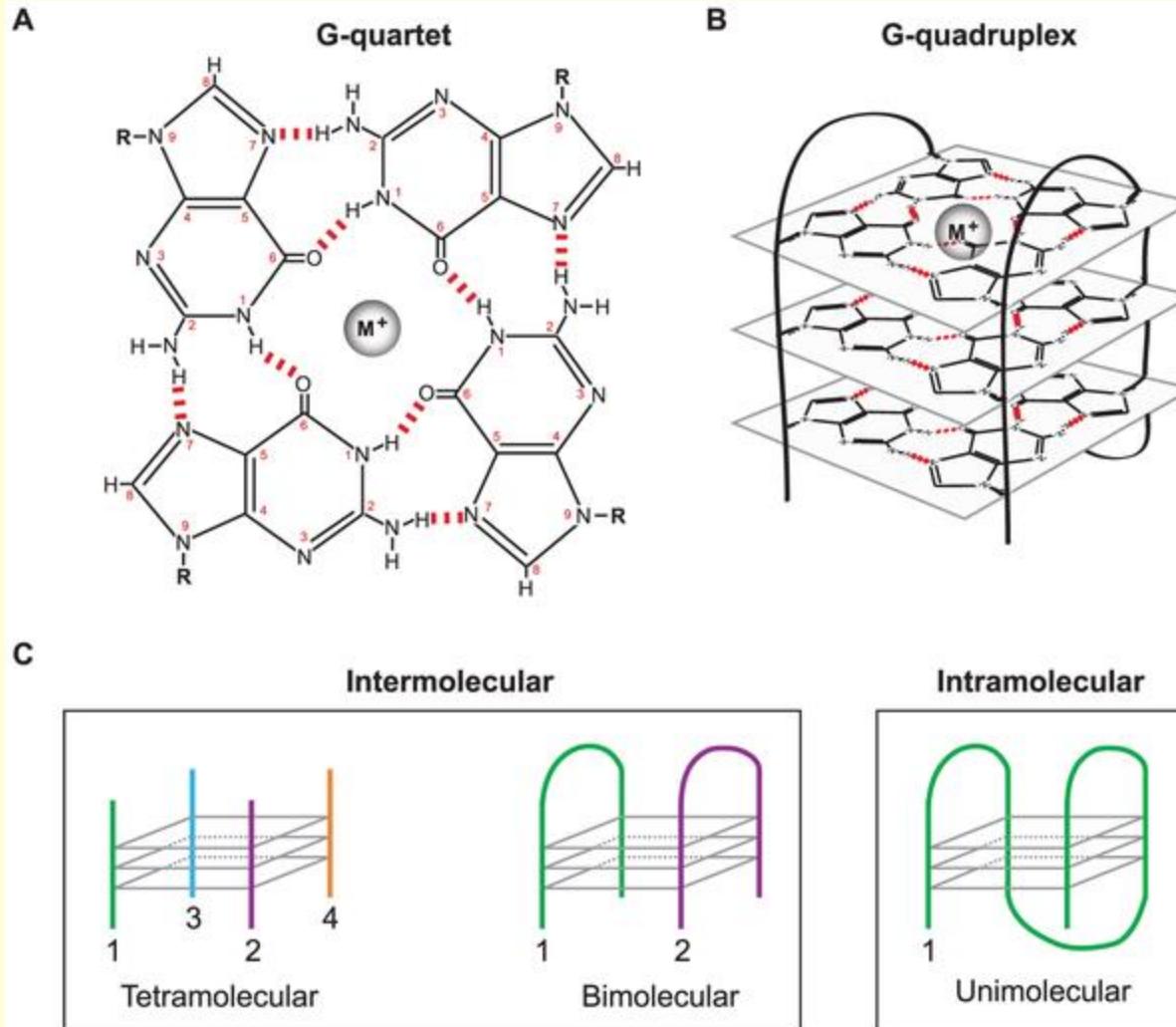


# Primer: DNK

---

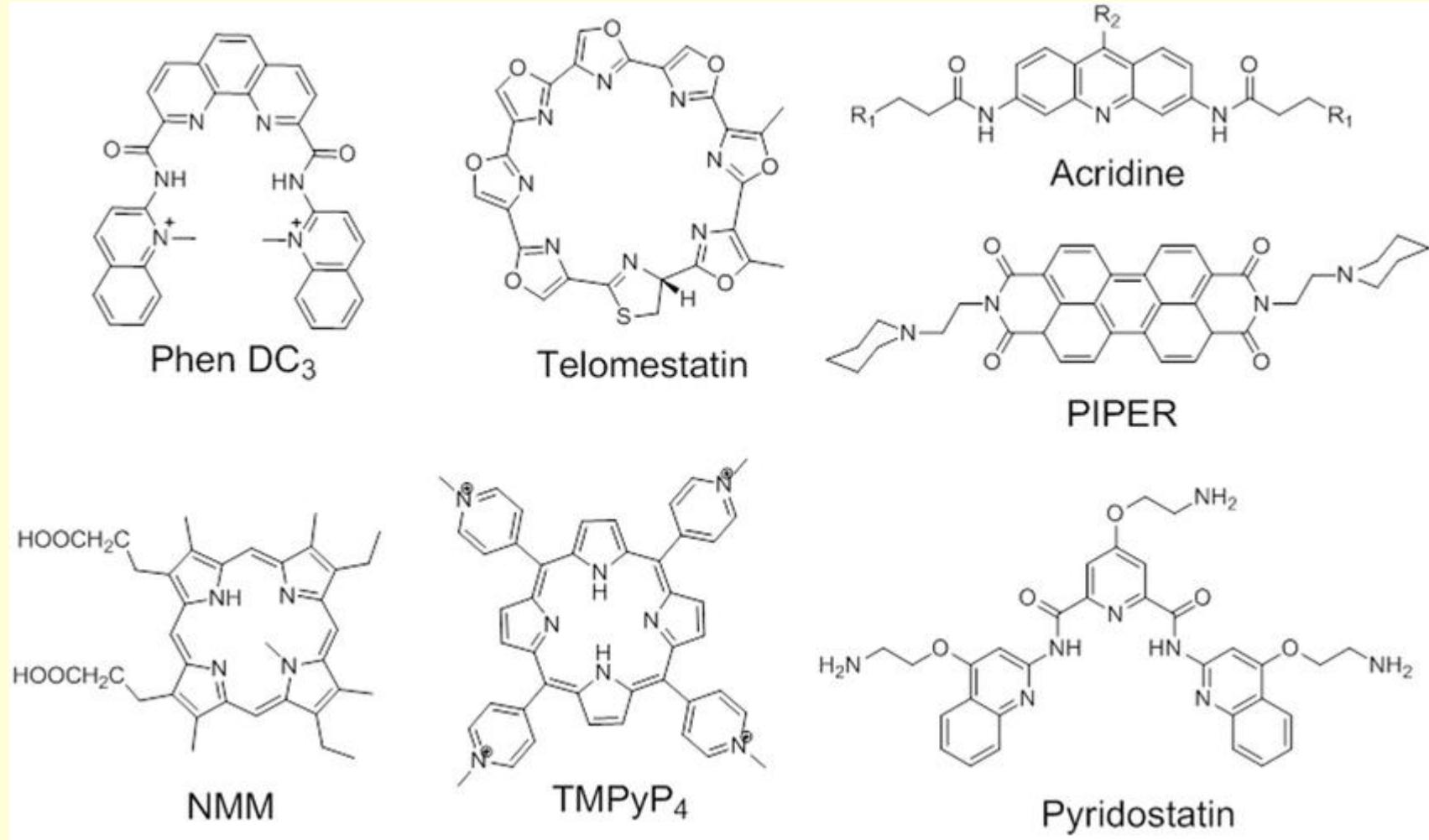


# Primer: kvadrupleks guanina

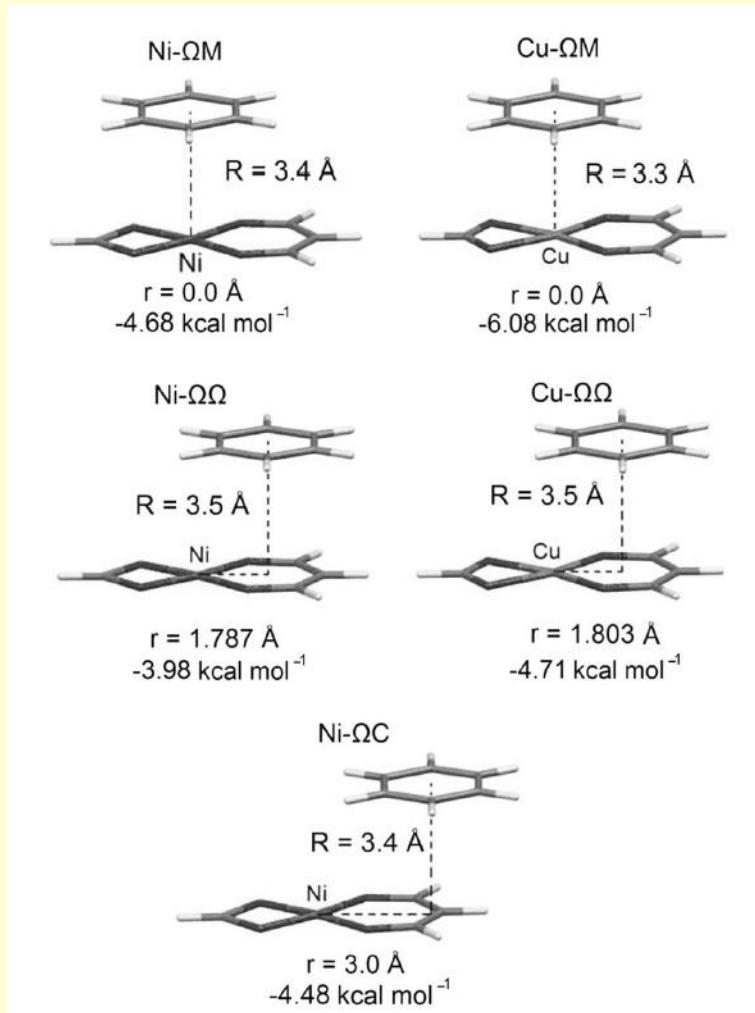


# Primer: kvadrupleks guanina – ligandi

---



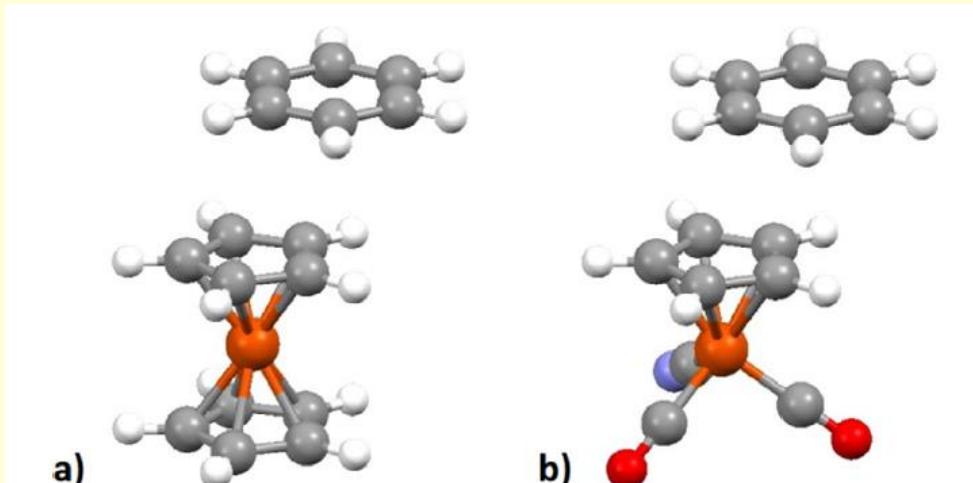
# Steking interakcije i helatni prstenovi



$$E_{\text{benzen-benzen}} = -2.73 \text{ kcal/mol}$$

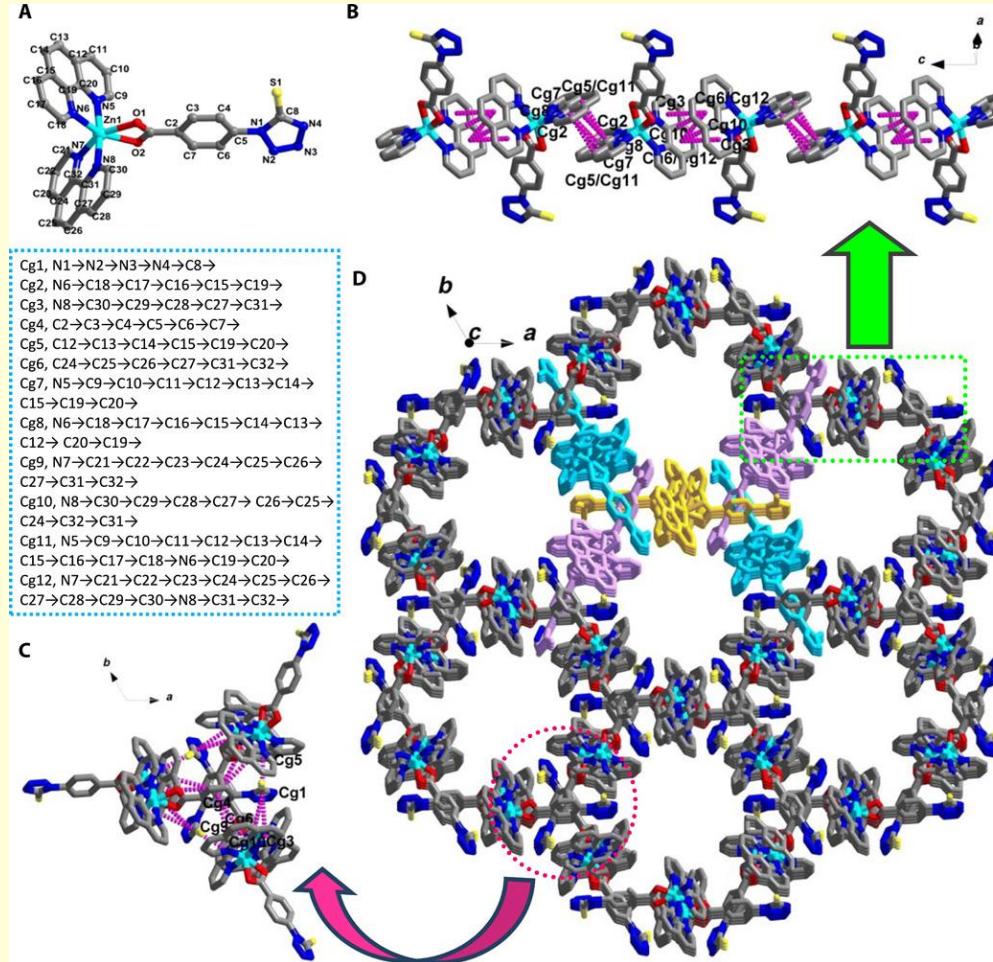
# Steking interakcije i koordinacija sa prelaznim metalima

---

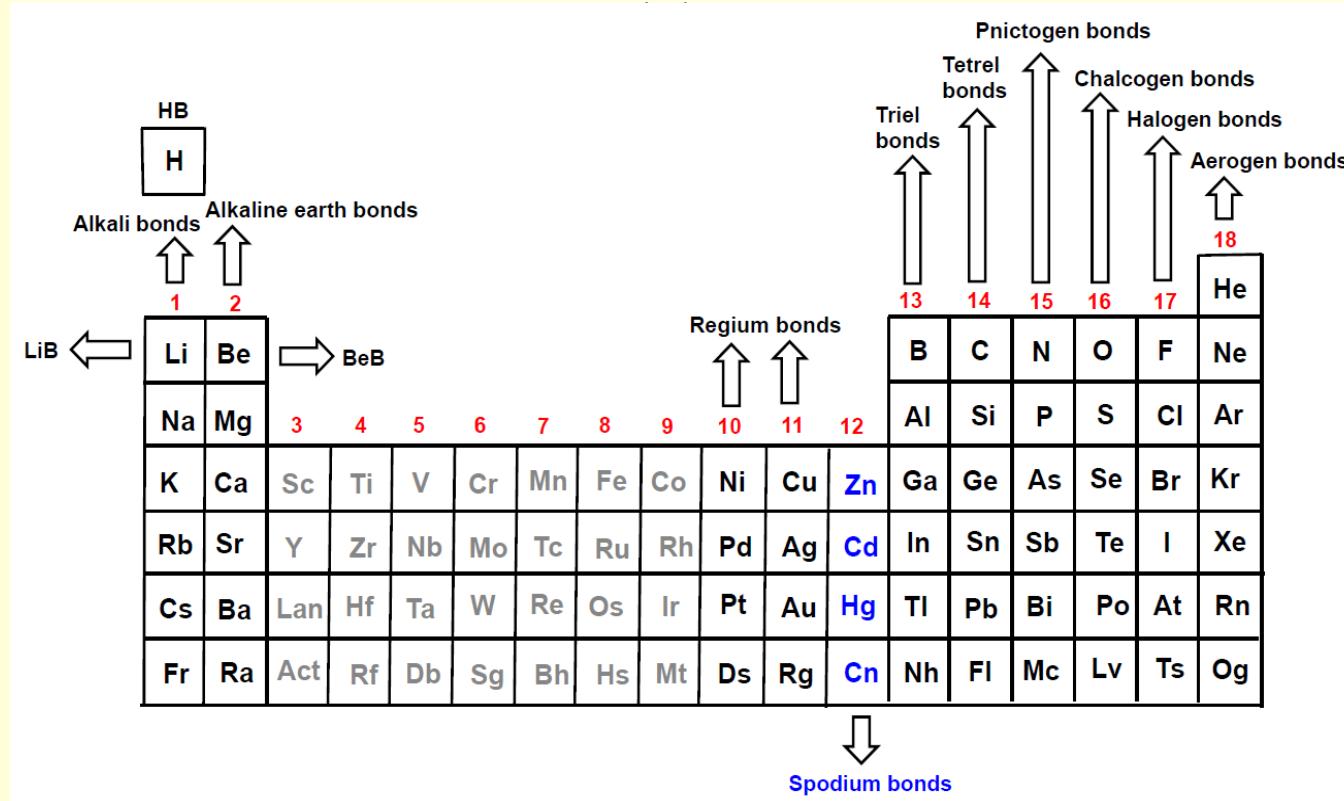


**Fig. 32.** Parallel-displaced geometries of stacking interactions between uncoordinated benzene and a) sandwich  $[\text{FeCp}_2]$ , b) half-sandwich  $[\text{FeCp}(\text{CN})(\text{CO})_2]$ .

# Primer: porozne supramolekulske strukture

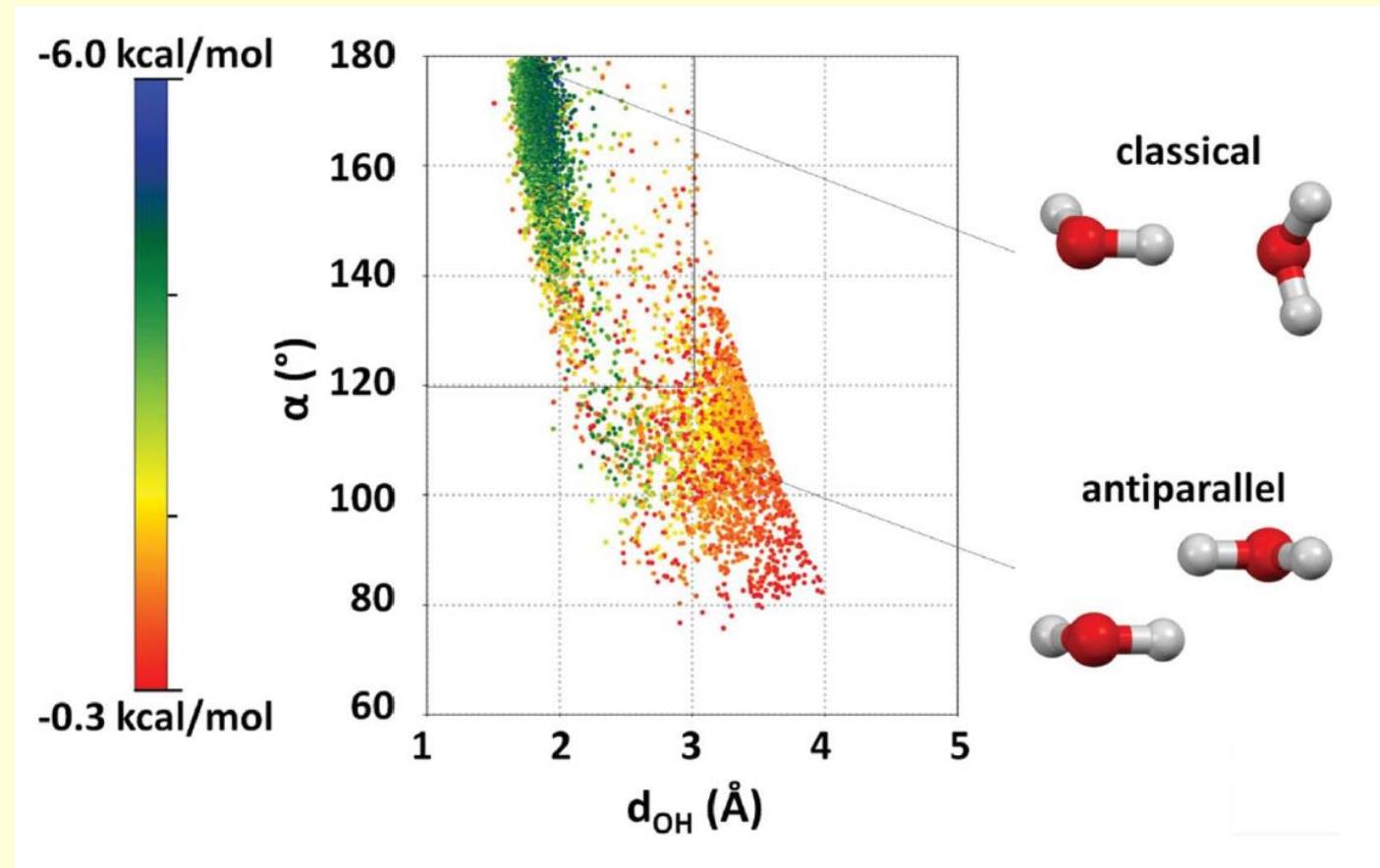


# Vrstste nekovalentnih interakcija



➤ steking interakcije

# Antiparalelni molekuli vode



# Kristalne strukture

---

vodonične veze i steking interakcije

# Apstrakt

---

Napisati apstrakt o halogenim vezama.